

This Page Is Inserted by IFW Operations
and is not a part of the Official Record

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

**As rescanning documents *will not* correct images,
please do not report the images to the
Image Problem Mailbox.**

This Page Blank (uspto)

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 11-162974

(43)Date of publication of application : 18.06.1999

(51)Int.Cl. H01L 21/316
H01L 21/00

(21)Application number : 09-327616

(71)Applicant : NEC CORP

(22)Date of filing : 28.11.1997

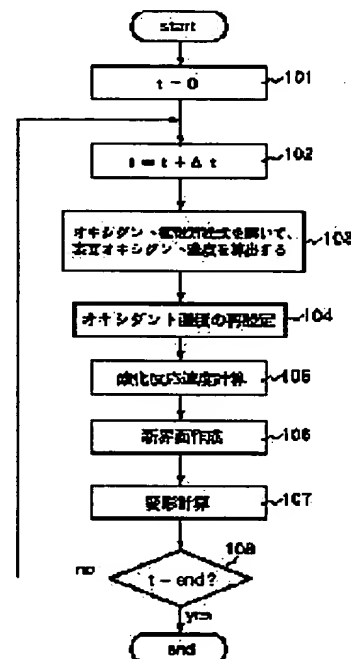
(72)Inventor : AKIYAMA YUTAKA

(54) PROCESS SIMULATION METHOD

(57)Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To provide a process simulation method for suppressing growth of micro oxide film thickness, and saving unnecessary calculation.

SOLUTION: In an oxide film, an oxidant diffusion equation is solved, surface oxidant concentration at the interface of the oxide film and silicon is calculated (step 103). Growing film thickness in respective nodes on the interface is calculated. When the value is not more than a prescribed value, surface oxidant concentration at present time is preserved, preserved surface oxidant concentration is added at next time, and surface oxidant concentration is reset (step 104). The oxidized reaction speed of the interface is calculated by using surface oxidant concentration which is set again (step 105). The new interface is generated based on oxidized reaction speed (step 106), and the deformation of a form is calculated (step 107). Then, the steps 102-107 are repeated at prescribed time cut Δt until it becomes termination time (step 108).



LEGAL STATUS

[Date of request for examination] 28.11.1997

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number] 3016385

[Date of registration] 24.12.1999

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

This Page Blank (uspto)

(1)

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平11-162974

(43) 公開日 平成11年(1999) 6月18日

(51) Int.Cl.⁶

識別記号

F I

H 0 1 L 21/316

H 0 1 L 21/316

S

Z

21/00

21/00

21/94

A

審査請求 有 請求項の数 6 O L (全 7 頁)

(21) 出願番号 特願平9-327616

(22) 出願日 平成9年(1997)11月28日

(71) 出願人 000004237

日本電気株式会社

東京都港区芝五丁目7番1号

(72) 発明者 秋山 豊

東京都港区芝5丁目7番1号 日本電気株式会社内

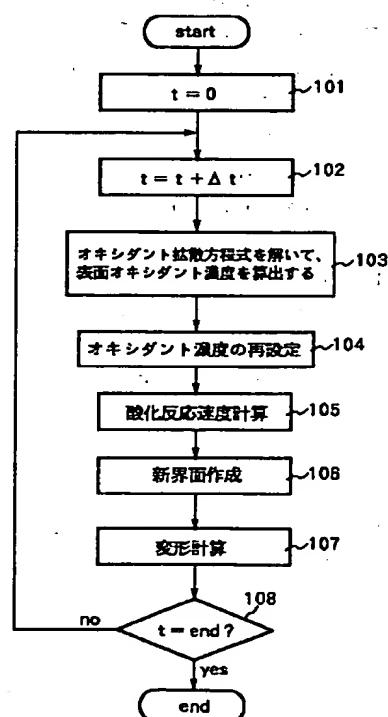
(74) 代理人 弁理士 松浦 兼行

(54) 【発明の名称】 プロセスシミュレーション方法

(57) 【要約】

【課題】 従来は、酸化膜成長がどんなに小さくても、常に酸化膜の成長膜厚を計算しているため、無駄な酸化計算を行っており、計算時間が長くなる。

【解決手段】 本発明は、酸化膜中でオキシダント拡散方程式を解き、酸化膜とシリコンとの界面における表面オキシダント濃度を算出し（ステップ103）、界面上の各節点における成長膜厚を計算してその値が所定値以下のときは現時刻における表面オキシダント濃度を保存し、次の時刻において保存しておいた表面オキシダント濃度を足し込み表面オキシダント濃度の再設定を行う（ステップ104）。続いて、再設定した表面オキシダント濃度を用いて界面の酸化反応速度を計算し（ステップ105）、酸化反応速度に基づいて新界面を作成し（ステップ106）、形状の変形計算を行う（ステップ107）。終了時刻に達するまでステップ102～107を所定の時間刻み Δt で繰り返す（ステップ108）。



1

【特許請求の範囲】

【請求項1】 酸化膜中でオキシダント拡散方程式を解き、酸化膜とシリコンとの界面における表面オキシダント濃度を算出する第1のステップと、

前の時刻において保存しておいた前記表面オキシダント濃度を前記第1のステップで算出した表面オキシダント濃度に足し込んで現時刻の表面オキシダント濃度とすると共に、該現時刻の表面オキシダント濃度を用いて計算した前記界面上の節点における成長膜厚が所定値以下のときは該現時刻の表面オキシダント濃度を保存し、かつ、酸化反応速度計算のために用いる現時刻の表面オキシダント濃度をクリアする、前記表面オキシダント濃度の再設定を、前記界面上の各節点のそれぞれに行う第2のステップと、

前記第2のステップで再設定した現時刻の表面オキシダント濃度を用いて前記界面の酸化反応速度を計算する第3のステップと、

前記酸化反応速度に基づいて新界面を作成する第4のステップと、

形状の変形計算を行う第5のステップと、

酸化計算時刻が終了時刻に達したかどうかを判断し、該終了時刻に達するまで上記の第1乃至第5のステップを所定の時間刻みで繰り返す第6のステップとを含むことを特徴とするプロセスシミュレーション方法。

【請求項2】 前記第2のステップは、前記界面上の節点の一つを選ぶステップと、前時刻にて保存しておいた前記表面オキシダント濃度を現時刻の表面オキシダント濃度に足し込み、現時刻の表面オキシダント濃度とするステップと、この現時刻の表面オキシダント濃度を用いて成長膜厚を計算するステップと、計算した前記成長膜厚が前記所定値以下であるか否かを判定するステップと、その判定の結果その節点における前記成長膜厚が前記所定値以下のときのみ現時刻における表面オキシダント濃度を保存し、かつ、前記第3のステップで酸化反応速度計算のために用いる現時刻の表面オキシダント濃度をクリアするステップとを、前記界面上の節点すべてについて実行することを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

【請求項3】 前記第3のステップは、前記再設定した現時刻の表面オキシダント濃度に所定の係数を乗じるこ

$$\frac{dT_{ox}}{dt} = \frac{B}{2T_{ox}^2 + A}$$

ただし、上式中、 t は酸化時刻、 T_{ox} は現時刻での酸化膜厚、 T_{ox}^0 は前時刻での酸化膜厚、 A 及び B は酸化速度に関するパラメータである。

【0005】ところで、LSI中では、デバイス同士が電気的に影響を及ぼさぬように、窒化シリコンを酸化マスクに使用する選択酸化法(LOCOS)やトレンチ等によって素子分離を行う。このため、近年のデバイスの微細化に伴い、LOCOS、トレンチ等によって素子分

2

とにより、前記界面の酸化反応速度を計算することを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

【請求項4】 前記表面オキシダント濃度を用いて成長膜厚を計算するステップは、前記現時刻の表面オキシダント濃度に所定の係数と前記所定の時間刻みとをそれぞれ乗じた値を前記成長膜厚とすることを特徴とする請求項2記載のプロセスシミュレーション方法。

【請求項5】 前記第2のステップにおいて前記成長膜厚と比較する前記所定値は、1Åであることを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

【請求項6】 LOCOS酸化の酸化計算に適用することを特徴とする請求項1記載のプロセスシミュレーション方法。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明はプロセスシミュレーションに係り、特に半導体製造工程における酸化プロセス等をコンピュータを用いて計算するプロセスシミュレーション方法に関する。

【0002】

【従来の技術】プロセスシミュレータとは、酸化プロセス、拡散プロセス、イオン注入プロセス等の半導体トランジスタ製造工程をコンピュータを用いて計算し、トランジスタの不純物プロファイル等の内部物理量や形状を予測するものである。プロセスシミュレータを用いて、半導体デバイスが最高の電気特性を発揮するようにトランジスタの最適化を行えば、実際に大規模半導体集積回路(LSI)を試作するのに比べて、費用/期間ともに大幅に短縮することができる。

【0003】プロセスシミュレータでは、各種半導体トランジスタ製造工程をコンピュータを用いて計算するため、それぞれのプロセス毎にモデル式が組み込まれている。例えば、文献1(森末道忠、"VLSI設計・製造シミュレーション"(CMC)、1987, pp.51-63)にあるように、酸化プロセスに関しては、Deal Groveの次式を解いて、酸化膜厚の時間変化をシミュレーションする方法がある。

【0004】

【数1】

(1)

離のシミュレーションも必要となり、プロセスシミュレーションの2次元化が進められている。2次元LOCOS酸化の計算方法としては、文献2("半導体プロセスデバイスシミュレーション技術"、リアライズ社刊、p.79-89)に示された方法がある。

【0006】図7は従来のプロセスシミュレーションの一例のフローチャートを示す。この従来例は2次元の酸化計算をシミュレートする方法であり、まず、酸化計算

3

時の時刻 t をゼロに設定した後 (ステップ 501)、酸化計算時刻 t を時刻 Δt 進める (ステップ 502)。続いて、酸化膜中で次式のオキシダント拡散方程式 (ラプラス方程式) を解き、酸化膜とシリコンの界面における

$$D_{ox} \nabla^2 C_{ox} = 0$$

次に、上記の表面オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} を用いて、シリコン界面の酸化反応速度 dT_{ox}/dt を次式により計算する (ステップ 504)。

$$\frac{dT_{ox}}{dT} = K \cdot C_{ox}^{surf}$$

このとき、酸化反応速度 dT_{ox}/dt の方向は、界面と鉛直方向とする。

【0009】次に、酸化膜とシリコンの界面における酸化反応速度 dT_{ox}/dt と時間刻み Δt とから、新界面を作成する (ステップ 505)。続いて、形状の変形計算を行った後 (ステップ 506)、酸化計算時刻 t が終了時刻 end に達したかどうかを判断し (ステップ 507)、終了時刻 end に達するまで上記のステップ 502~507 の処理を繰り返す。

【0010】上述のように、酸化反応速度は、オキシダント濃度から計算するが、低温で酸化反応速度が小さく、また精度を保証するため時間刻み Δt を細かくした場合では、酸化膜成長は非常に小さい。

【0011】また、図4に示すような、シリコン41の上に窒化膜42をマスクとして設け、シリコン41の上に酸化膜43を形成するLOCOS酸化の場合、酸化雰囲気から導入されたオキシダント44は、酸化膜43中を拡散してシリコン41の表面に達するが、窒化膜42の下付近ではオキシダント濃度が小さく、酸化膜成長は非常に小さい。従来は、このような酸化膜成長が非常に小さい場合でも、常に酸化膜の成長膜厚を計算し、新界面 (シリコンと酸化膜の境界) を作成していた。

【0012】例えば、図8のような1次元構造の酸化を例にとると、同図 (a) に示す酸化解析時刻 $t = t_0$ のときのシリコン51aと酸化膜52aの状態から同図 (b) に示す酸化解析時刻 $t = t_2$ におけるシリコン51bと酸化膜52b、同図 (c) に示す酸化解析時刻 $t = t_2$ におけるシリコン51cと酸化膜52cとに変化した場合に、酸化膜の成長が小さい場合でも、常に不要な酸化計算を行っている。

【0013】図6は図4の窒化膜42の下的一部分を拡大した図で、従来の酸化時刻 t_0 、 t_1 、 t_2 における酸化の進行を示す。LOCOSの窒化膜下では、シリコン表面のオキシダント濃度が小さくなるため、成長酸化膜厚はLOCOSの窒化膜下では小さくなる。従来は、成長酸化膜厚がどんなに小さくても、常に酸化膜/シリコン界面と鉛直方向に酸化を進めていた。

【0014】

【発明が解決しようとする課題】従来は、酸化膜成長がどんなに小さくても、常に酸化膜の成長膜厚を計算して

4

表面オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} を求める (ステップ 503)。

【0007】

【数2】

(2)

【0008】

【数3】

(3)

いるため、酸化膜成長が非常に小さい場合でも、常に酸化膜の成長膜厚を計算し、新界面 (シリコンと酸化膜の境界) を作成し、無駄な酸化計算を行っており、計算時間が長くなるという問題がある。

【0015】これを解決する方策の一つとして、成長膜厚がある値以下 (例えば1Å) の場合には、酸化膜成長を全くさせないということも考えられるが、低温で酸化反応速度が小さく、また、精度を保証するため時間刻み Δt を細かくした場合、いくら酸化時間が経過しても酸化膜成長が進まないという問題がある。

【0016】本発明は以上の点に鑑みなされたもので、微小な酸化膜厚成長を抑制し、不要な計算を省いたプロセスシミュレーション方法を提供することを目的とする。

【0017】また、本発明の他の目的は、計算時間の高速なプロセスシミュレーション方法を提供することにある。

【0018】

【課題を解決するための手段】上記の目的を達成するため、本発明は酸化膜中でオキシダント拡散方程式を解き、酸化膜とシリコンとの界面における表面オキシダント濃度を算出する第1のステップと、前の時刻において保存しておいた表面オキシダント濃度を第1のステップで算出した表面オキシダント濃度に足し込んで現時刻の表面オキシダント濃度とすると共に、現時刻の表面オキシダント濃度を用いて計算した界面上の節点における成長膜厚が所定値以下のときは現時刻の表面オキシダント濃度を保存し、かつ、酸化反応速度計算のために用いる現時刻の表面オキシダント濃度をクリアする、表面オキシダント濃度の再設定を、界面上の各節点のそれぞれに行う第2のステップと、第2のステップで再設定した現時刻の表面オキシダント濃度を用いて界面の酸化反応速度を計算する第3のステップと、酸化反応速度に基づいて新界面を作成する第4のステップと、形状の変形計算を行う第5のステップと、酸化計算時刻が終了時刻に達したかどうかを判断し、終了時刻に達するまで上記の第1乃至第5のステップを所定の時間刻みで繰り返す第6のステップとを含むようにしたものである。

【0019】本発明では、酸化計算時の各時間刻みにおいて、成長膜厚が所定値以下の場所 (界面上の節点) で

5

は、酸化膜厚を増加させないでその場所でのオキシダント濃度を保持し、上記の所定値より大なる成長酸化膜厚になった時点で酸化膜厚を成長させる。

【0020】

【発明の実施の形態】次に、本発明の実施の形態について図面と共に説明する。図1は本発明になるプロセスシミュレーション方法の一実施の形態のフローチャートを示す。まず、酸化計算時の時刻 t をゼロに設定した後

$$D_{ox} \nabla^2 C_{ox} = 0$$

次に、この実施の形態の特徴である、上記の表面オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} の再設定を後述するように行う（ステップ104）。続いて、上記の表面オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} を用いて、シリコン界面の酸化反応速度 $d T_{ox}$

$$\frac{dT_{ox}}{dT} = K \cdot C_{ox}^{surf}$$

このとき、酸化反応速度 $d T_{ox} / d t$ の方向は、シリコン界面に対して鉛直方向となる。

【0023】次に、酸化膜とシリコンの界面における酸化反応速度 $d T_{ox} / d t$ と時間刻み Δt とから、新界面を作成する（ステップ106）。続いて、酸化膜や窒化膜の形状の変形計算を行った後（ステップ107）、酸化計算時刻 t が終了時刻 end に達したかどうかを判断し（ステップ108）、終了時刻 end に達するまで上記のステップ102～108の処理を繰り返す。

【0024】次に、本発明の特徴であるステップ104のオキシダント濃度の再設定処理について、図2のフローチャートと共に更に詳細に説明する。まず、界面上の

$$\Delta T_{ox} = K \cdot C_{ox}^{surf} \cdot \Delta t$$

次に、各節点における成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ 以下であるか否か判定し（ステップ204）、各節点における成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ 以下であるときのみ、現時刻オキシダント濃度を、時間刻み Δt 後の次の時刻でのその節点における表面オキシダント濃度算出のために保存した後（ステップ205）、保存前の現時刻オキシダント濃度をクリアする（ステップ206）。

【0027】各節点における成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ より大であるとき、又はステップ206で現時刻オキシダント濃度をクリアした後、界面上の節点をすべて調べたかどうか判定し（ステップ207）、界面上の節点のすべてについて各節点における成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ 以下であるかどうか調べるまでステップ201～206の処理を繰り返す。

【0028】従って、この実施の形態では、各節点における成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ より大であるときには、ステップ202で得られた表面オキシダント濃度の加算結果に基づき、ステップ203で成長膜厚計算し、図1のステップ105で酸化反応速度を計算してステップ105で新界面を作成して従来と同様に酸化膜成長をさせるのに対し、ある節点における成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ 以下であるときには、ステップ206で現時刻のオキ

6

（ステップ101）、酸化計算時刻 t を時刻 Δt 進める（ステップ102）。続いて、酸化膜中で次式のオキシダント拡散方程式（ラプラス方程式）を解き、酸化膜とシリコンの界面における表面オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} を求める（ステップ103）。

【0021】

【数4】

(4)

$\nabla^2 C_{ox} = 0$ を次式により計算する（ステップ105）。

【0022】

【数5】

(5)

ある一つの節点を選び（ステップ201）、時間刻み Δt 前の時刻にて後述のステップ205で保存しておいたその節点における前時刻の表面オキシダント濃度を、図1のステップ103で算出した現時刻の表面オキシダント濃度に足し込み、その加算結果を現時刻の表面オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} とする（ステップ202）。

【0025】続いて、現時刻オキシダント濃度 C_{ox}^{surf} を用いて、成長膜厚 ΔT_{ox} を次式により計算する（ステップ203）。

【0026】

【数6】

(6)

シダント濃度をクリアしているので、その節点については図1のステップ105で酸化反応速度がゼロであり、よって酸化膜成長はしないようにしている。

【0029】その後、成長膜厚 ΔT_{ox} が所定値 ϵ より大になった時点で、それまでステップ103で算出し、ステップ205で保存しておいた表面オキシダント濃度を現時刻表面オキシダント濃度に足し込んだ値に基づいて、一気に酸化膜成長させることとなる。

【0030】この実施の形態を、1次元形状に実施した場合の動作を図3に示す。同図(a)に示す酸化解析時刻 $t = t_0$ のときのシリコン31a上の酸化膜32aの成長膜厚が所定値 ϵ (例えば、1 Å) 以下の場合には、酸化膜成長をせずに、同図(b)に示す酸化解析時刻 $t = t_2$ におけるシリコン31bと酸化膜32bとの界面のオキシダント濃度33を保存する。そして、同図(c)に示す酸化解析時刻 $t = t_2$ において、保存しておいたオキシダント濃度を現時刻に足し込み、一気に酸化を行い、シリコン31c上に酸化膜32cを成長させる。その結果、不要な酸化計算を省くことが可能であり、計算時間を短縮することができる。

【0031】

【実施例】次に、本発明の一実施例について説明する。

50

7

図5は2次元LOCOS構造に適用した本発明の一実施例の拡大図を示す。図4に示すようなLOCOS酸化の場合、前述したように酸化雰囲気から導入されたオキシダント44は、酸化膜43中を拡散してシリコン41の表面に達するが、窒化膜42の下付近ではオキシダント濃度が小さく、酸化膜成長は非常に小さい。しかし、従来は酸化膜成長が非常に小さい場合でも常に酸化膜の成長膜厚を計算し、新界面（シリコン41と酸化膜43の境界）を作成していた。

【0032】これに対し、この実施例では、図4の窒化膜42の下破線で示した部分の拡大図である図5に示すように、酸化膜は酸化時刻 $t = t_0$ 、 t_1 、 t_2 の経過に従って図示のように進行する。まず、時刻 t_0 から t_1 における酸化の様子について説明するに、オキシダント拡散方程式（ラプラス方程式）を酸化膜中で解き、時刻 $t = t_0$ における酸化膜とシリコンの界面の表面オキシダント濃度 $C^{surf}_{0,x}$ を求める。

【0033】次に、シリコンと酸化膜との界面上の節点毎に、前時刻にて保存しておいたオキシダント濃度を現時刻オキシダント濃度に足し込み、現時刻オキシダント濃度 $C^{surf}_{1,x}$ とする。そして、シリコンと酸化膜との界面上の各節点において、現時刻オキシダント濃度 $C^{surf}_{1,x}$ から、時刻 $t = t_0$ から時刻 $t = t_1$ における酸化膜厚の増分 $\Delta T_{0,x}$ を算出する。

【0034】本実施例では、時刻 $t = t_1$ における成長膜厚が、ある値以下の場所がある。その場合、時刻 $t = t_1$ における成長膜厚がある値以下の場所では、酸化膜成長をせずにシリコンと酸化膜との界面におけるオキシダント濃度を保存する。一方、時刻 $t = t_1$ における成長膜厚がある値以上の場所では、酸化膜成長をさせる。

【0035】次に、時刻 $t = t_1$ から時刻 $t = t_2$ における酸化の様子について説明するに、オキシダント拡散方程式（ラプラス方程式）を酸化膜中で解き、時刻 $t = t_1$ における酸化膜とシリコンの界面の表面オキシダント濃度 $C^{surf}_{1,x}$ を求める。シリコンと酸化膜との界面上の節点毎に、前時刻にて保存しておいたオキシダント濃度を現時刻オキシダント濃度に足し込み、現時刻オキシダント濃度 $C^{surf}_{2,x}$ とする。シリコンと酸化膜との界面上の各節点において、現時刻オキシダント濃度 $C^{surf}_{2,x}$ か

8

ら、時刻 $t = t_1$ から時刻 $t = t_2$ における酸化膜厚の増分 $\Delta T_{1,x}$ を算出する。本実施例では、前時刻（ $t = t_0$ ）におけるオキシダント濃度を足し込んだ結果、窒化膜下におけるオキシダント濃度がある値以上となり、酸化膜成長が起こる。

【0036】

【発明の効果】以上説明したように、本発明によれば、成長膜厚が所定値以下の時には、酸化膜成長をさせず、シリコンと酸化膜との界面におけるオキシダント濃度を保存しておき、上記の所定値より大なる成長酸化膜厚になった時点で前時刻において保存しておいたオキシダント濃度を現時刻のオキシダント濃度に足し込み、一気に酸化膜厚を成長させるようにしたため、不要な酸化計算を省くことができ、これにより計算時間を従来よりも短縮することができる。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施の形態のフローチャートである。

【図2】図1中のオキシダント再設定処理を示すフローチャートである。

【図3】1次元構造の酸化に関して本発明の動作説明図である。

【図4】酸化計算によるLOCOS形状を示す断面図である。

【図5】本発明の一実施の形態による図4の拡大図である。

【図6】従来の形状変化を示す図4の拡大図である。

【図7】従来方法の一例のフローチャートである。

【図8】1次元構造の酸化に関して従来の動作説明図である。

【符号の説明】

31a～31c、41 シリコン

32a～32c、43 酸化膜

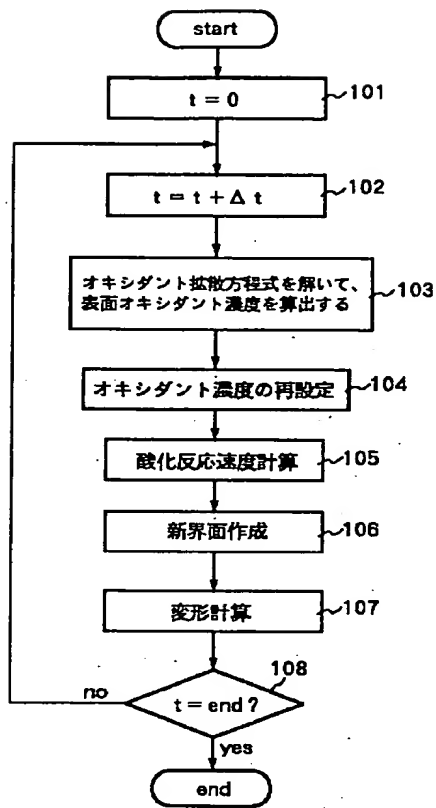
42 窒化膜

44 オキシダント

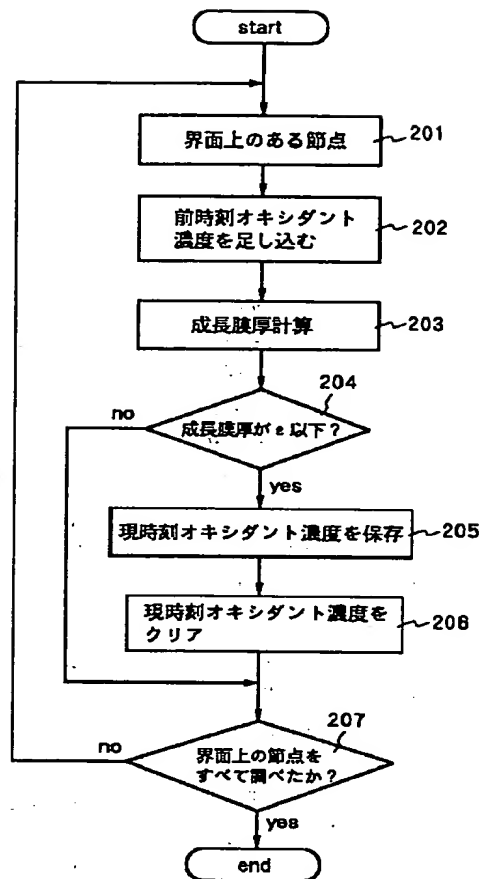
101～106 本発明の一実施の形態の処理ステップ

201～207 オキシダント濃度再設定の処理ステップ

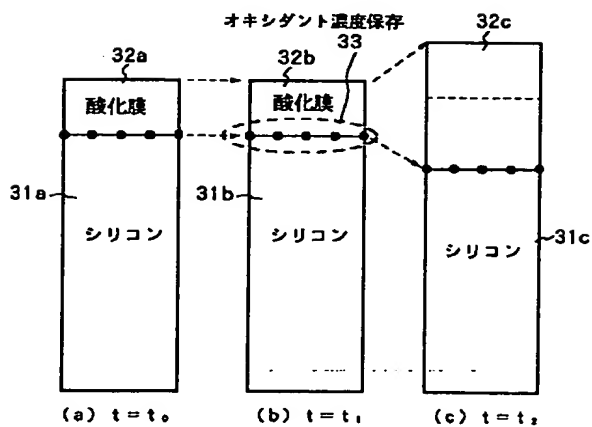
【図 1】



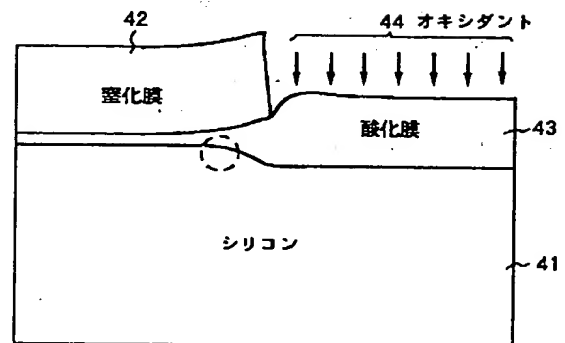
【図 2】



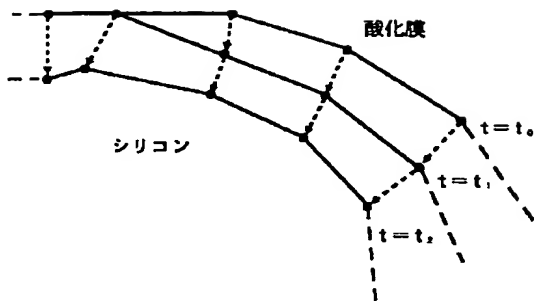
【図 3】



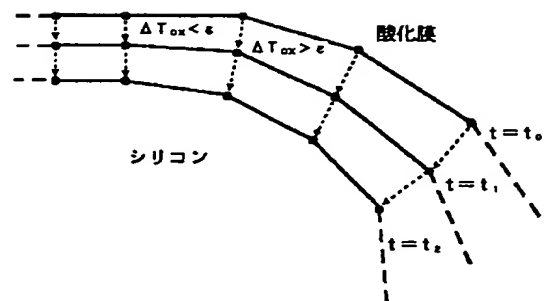
【図 4】



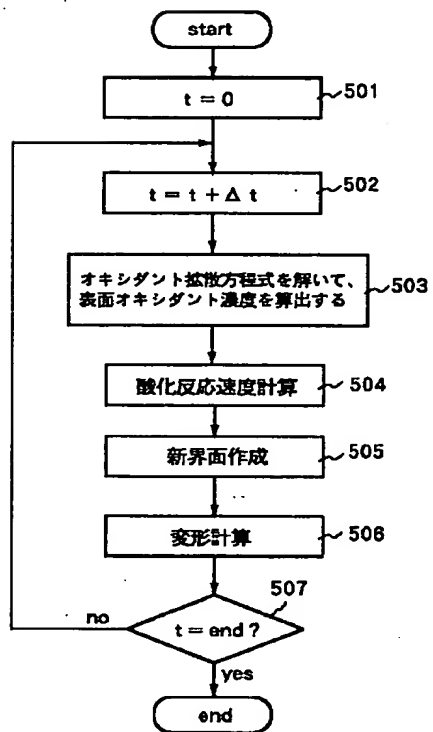
【図 5】



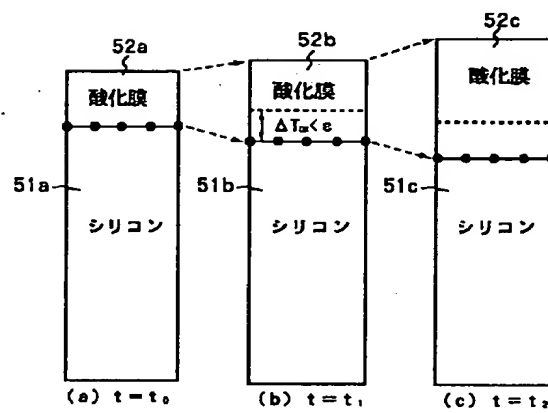
【図 6】



【図 7】



【図 8】



This Page Blank (uspto)